



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 110 за 2015 г.



ISSN 2071-2898 (Print)  
ISSN 2071-2901 (Online)

**Борисов В.Е., Кулешов А.А.,  
Савенков Е.Б., Якуш С.Е.**

Программный комплекс TCS  
3D: вычислительная модель

**Рекомендуемая форма библиографической ссылки:** Программный комплекс TCS 3D: вычислительная модель / В.Е.Борисов [и др.] // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2015. № 110. 20 с.

URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2015-110>

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
ОРДЕНА ЛЕНИНА  
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ  
имени М. В. КЕЛДЫША

В.Е. Борисов, А.А. Кулешов, Е.Б. Савенков, С.Е. Якуш

**Программный комплекс TCS 3D:  
вычислительная модель**

Москва, 2015

*В.Е. Борисов, А.А. Кулешов, Е.Б. Савенков, С.Е. Якуш*, Программный комплекс TCS 3D: вычислительная модель

**Аннотация.** Программный комплекс TCS-3D предназначен для прямого численного моделирования трехмерных турбулентных течений многокомпонентной смеси реагирующих газов на вычислительных системах сверхвысокой производительности. Данная работа посвящена описанию соответствующей вычислительной модели, которая легла в основу ядра программы. В работе подробно описан алгоритм расчета на одном сеточном блоке, а также общая схема организации параллельных вычислений на иерархии адаптивно измельчаемых сеток для адекватного разрешения зоны реакции, при этом аппроксимация уравнений переноса осуществляется схемой высокого порядка точности. Приведены примеры тестовых расчетов, демонстрирующие эффективность адаптивно измельчаемых сеток для течений с горением.<sup>1</sup>

**Ключевые слова:** прямое численное моделирование, дозвуковое горение, адаптивные сетки

*V.E. Borisov, A.A. Kuleshov, E.B. Savenkov, S.E. Yakush*, TCS 3D simulator: computational model

**Abstract.** TCS-3D simulator is software for direct numerical simulation of 3D turbulent reacting multicomponent flows on supercomputer. In this paper we present description of computational model, which was put into the essence of the program's core. The single grid algorithm and overall scheme of parallel computations on hierarchical grid structure are described. Transport equations are approximated by a high-order scheme. Test examples demonstrating efficiency of adaptive mesh refinement in application to combustion problems are presented.

**Key words and phrases:** Direct Numerical Simulation, Low Mach number combustion, adaptive mesh refinement

---

<sup>1</sup>Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 13-01-12058 офи\_м)

# 1 Введение

Моделирование процессов турбулентного смесеобразования и горения газов, в том числе в сильно неравновесных условиях, является одной из актуальных задач современной вычислительной гидрогазодинамики. Характерная особенность этой задачи заключается в наличии многомасштабных вихревых структур и динамических фронтов концентраций компонент воздушно-газовой смеси, численное моделирование которых в силу многомасштабности и большого числа компонент требует значительных вычислительных ресурсов [1]. Одним из способов достижения необходимого разрешения при сохранении вычислительной эффективности алгоритма решения термогазодинамических уравнений является использование сеток, динамически «подстраивающихся» под получаемое решение (адаптивных сеток) [2].

Разработанный авторами программный комплекс TCS-3D (Turbulent Combustion Simulator) предназначен для прямого численного моделирования трехмерных турбулентных течений многокомпонентной смеси реагирующих газов на вычислительных системах сверхвысокой производительности с использованием иерархии адаптивно измельчаемых сеток.

В работе [3] было представлено подробное описание математической модели, которая легла в основу вычислительного ядра программы. Настоящая работа посвящена описанию соответствующей вычислительной модели. В работе подробно описан алгоритм расчета на одном сеточном блоке, а также общая схема организации параллельных вычислений на иерархии адаптивно измельчаемых сеток для адекватного разрешения зоны реакции. Используются структурированные адаптивные сетки, состоящие из иерархии топологически одинаковых блоков, причем каждый следующий уровень измельчения соответствует уменьшению пространственного шага сетки в два раза [2]. В пределах блока аппроксимация уравнений осуществляется на декартовой сетке с постоянным шагом по каждому пространственному направлению, что обуславливает простоту алгоритма и возможность использования уже существующих вычислительных моделей. Аппроксимация уравнений переноса осуществляется схемой высокого порядка точности WENO3 [4].

В конце работы приводятся примеры тестовых расчетов; демонстрируется эффективность адаптивно измельчаемых сеток для течений с горением.

## 2 Краткое описание математической модели

Математическая модель, используемая в программной комплексе TCS-3D, подробно описана в работе [3]. Для удобства еще раз приведем ее здесь в кратком виде. Система уравнений Навье-Стокса в приближении малых чисел Маха записывается следующим образом:

$$\frac{\partial \rho Y_m}{\partial t} + \nabla \cdot \rho Y_m \mathbf{U} = \nabla \cdot \mathcal{F}_m + \dot{\omega}_m, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \otimes \mathbf{U}) = -\nabla \pi + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \nabla \cdot \rho h \mathbf{U} = \nabla \cdot \mathcal{Q}. \quad (3)$$

Согласно модели средних по смеси значений диффузионные потоки  $\mathcal{F}_m$  и вектор потока тепла  $\mathcal{Q}$  имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_m &= \rho D_{m,mix} \nabla Y_m, \\ \mathcal{Q} &= \lambda \nabla T + \left( \sum_m h_m \mathcal{F}_m \right). \end{aligned}$$

Условие на дивергенцию скорости записывается как

$$\begin{aligned} \mathcal{S} \equiv \nabla \cdot \mathbf{U} &= \frac{1}{\rho c_{p,mix} T} \left( \nabla \cdot \lambda \nabla T + \sum_m \rho D_{m,mix} \nabla Y_m \nabla h_m \right) + \\ &+ \frac{1}{\rho} \sum_m \frac{W}{W_m} (\nabla \cdot \rho D_{m,mix} \nabla Y_m) + \frac{1}{\rho} \sum_m \left( \frac{W}{W_m} - \frac{h_m}{c_{p,mix} T} \right) \dot{\omega}_m. \quad (4) \end{aligned}$$

В представленных уравнениях  $m$  – индекс компонента смеси,  $\rho$  – плотность смеси,  $\mathbf{U} = (u, v, w)^T$  – вектор скорости смеси,  $Y_m$  – относительная массовая концентрация компонента  $m$ ,  $\dot{\omega}_m$  – приток компонента  $m$  за счет химических реакций,  $\boldsymbol{\tau}$  – тензор вязких напряжений,  $h_m$  – энтальпия компонента  $m$ ,  $h$  – энтальпия смеси,  $\pi = p - p_0$  – динамическая составляющая давления,  $p_0$  – термодинамическая составляющая давления,  $T$  – температура смеси,  $\lambda$  – коэффициент теплопроводности смеси,  $c_{p,mix}$  – теплоемкость смеси при постоянном давлении,  $D_{m,mix}$  – средний по смеси коэффициент диффузии компонента  $m$  относительно смеси,  $W_m$  – молекулярная масса компонента  $m$ ,  $W$  – средняя молекулярная масса смеси.

В указанных условиях выполнены следующие нормировочные соотношения:

$$\sum_m Y_m = 1, \quad \sum_m \dot{\omega}_m = 0, \quad \sum_m \mathcal{F}_m = \mathbf{0}.$$

Тензор вязких напряжений  $\boldsymbol{\tau}$  имеет вид:

$$\boldsymbol{\tau} = \mu \left( \nabla \otimes \mathbf{U} + (\nabla \otimes \mathbf{U})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{U}) \mathbf{I} \right),$$

где  $\mu$  – динамическая вязкость смеси,  $\mathbf{I}$  – единичный тензор.

Энтальпия смеси  $h$  записывается в виде:

$$h(T, Y_m) = \sum_m Y_m h_m(T).$$

Уравнение состояния смеси идеальных газов имеет следующий вид:

$$p_0 = \rho \mathcal{R} T \sum_m (Y_m / W_m),$$

где  $\mathcal{R}$  – универсальная газовая постоянная.

Массовая скорость притока компонента  $m$  за счет химических реакций имеет вид

$$\dot{\omega}_m = \sum_n \dot{\omega}_{mn} = W_m \sum_n \left( \nu''_{mn} - \nu'_{mn} \right) Q_n.$$

Здесь  $n$  обозначает номер реакции;  $\nu''_{mn}$  и  $\nu'_{mn}$  – стехиометрические коэффициенты компонента  $m$  в реакции  $n$ , а  $Q_n$  – скорость протекания  $n$ -й реакции, которая находится согласно детальной кинетической схеме с использованием закона Аррениуса, либо из глобального кинетического уравнения.

Представленные уравнения математической модели должны быть дополнены соотношениями для определения стехиометрических коэффициентов  $\nu''_{mn}$  и  $\nu'_{mn}$ , скорости реакции  $Q_n$ , коэффициентов переноса для смеси (вязкость  $\mu$ , теплопроводность  $\lambda$ , коэффициент диффузии  $D_{m,mix}$ ), а также теплофизическими свойствами смеси (теплоемкость  $c_{p,mix}$  и энтальпия  $h$ ). Их описание можно найти в [3].

### 3 Алгоритм решения на одном сеточном блоке

Для решения задачи в расчетной области, имеющей вид параллелепипеда со сторонами длиной  $L_x, L_y, L_z$ , вводится одноблочная ортогональная вычислительная сетка с заданным количеством ячеек сетки по каждому направлению:  $N_x, N_y, N_z$ . В целях устойчивости численного алгоритма используется разнесенная разностная сетка [5], таким образом первичные неизвестные рассчитываются

- $\rho_{i,j,k}, h_{i,j,k}, Y_{m,i,j,k}, \pi_{i,j,k}$  – в центрах ячеек,
- $u_{i\pm\frac{1}{2},j,k}, v_{i,j\pm\frac{1}{2},k}, w_{i,j,k\pm\frac{1}{2}}$  – в центрах соответствующих граней.

Алгоритм решения основывается на использовании проекционной схемы типа предиктор-корректор [6], а также методе расщепления по физическим

процессам [7]. Для аппроксимации уравнений по времени используется однослойная явная схема Эйлера; для аппроксимации по пространству – метод конечных разностей, записанный на разнесенной сетке, с использованием схемы реконструкции WENO3 [4] значений на гранях ячеек. Алгоритм решения на одном временном шаге (от  $t^n$  до  $t^{n+1}$ ) для одного сеточного блока кратко представлен на схеме 1. Рассмотрим его основные этапы более подробно.

---

**Алгоритм 1** Алгоритм решения на одном сеточном блоке

---

1. Вычисление текущего шага по времени  $\Delta t$ .
  2. Выполнение блока уравнений реакции-конвекции-диффузии:
    - (a) расчет химических реакций для определения  $\dot{\omega}_m(Y_m^n, T^n)$  на  $\Delta t$ ;
    - (b) расчет конвективных членов:  $\nabla \cdot (\rho Y_m \mathbf{U})^n$ ,  $\nabla \cdot (\rho h \mathbf{U})^n$ ,  $(\mathbf{U} \cdot \nabla \mathbf{U})^n$ ;
    - (c) решение уравнений конвекции-диффузии для определения  $Y_m^{n+1}$ ,  $\rho^{n+1}$ ,  $h^{n+1}$ .
  3. Вычисление предиктора для вектора скорости  $\mathbf{U}^*$ .
  4. Выполнение блока проекции:
    - (a) расчет динамической составляющей давления  $\pi^{n+1}$ ;
    - (b) расчет скорректированного вектора скорости  $\mathbf{U}^{n+1}$ .
- 

### 3.1 Вычисление текущего временного шага

Временной шаг вычисляется из условий устойчивости для явной схемы по числу Куранта:

$$\Delta t = \sigma \min_{m,i,j,k} \left( \frac{\Delta x}{|u_{i,j,k}|}, \frac{\Delta y}{|v_{i,j,k}|}, \frac{\Delta z}{|w_{i,j,k}|}, \sqrt{\frac{2\rho h_N}{|\mathbf{g}^T - (\nabla \pi)_{i,j,k}|}}, \frac{1}{2^N} \frac{\rho h_N^2}{\mu}, \frac{1}{2^N} \frac{h_N^2}{D_{m,mix}} \right),$$

где  $\mathbf{g}$  – гравитационный вектор,  $h_N = \min(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$  – минимальный шаг сетки,  $0 < \sigma < 1$  – число Куранта.

### 3.2 Интегрирование уравнений химической кинетики

На данном шаге происходит решение системы уравнений химической кинетики, полученной из системы (1)–(3) согласно схеме расщепления по физи-

ческим процессам [3, 7]:

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho Y_m}{\partial t} = \dot{\omega}_m, & m = 1 \dots N_c, \\ \rho c_{p,mix} \frac{\partial T}{\partial t} = - \sum_m \dot{\omega}_m h_m, \end{cases} \quad (5)$$

где  $N_c$  – число компонент. Получающаяся система ОДУ является жесткой, для ее решения используется многошаговый метод интегрирования жестких систем ОДУ [8]. После интегрирования системы (5) и обновления полей  $\rho Y_m$  и  $T$ , поле плотности пересчитывается с использованием соотношения

$$\rho = \sum_m \rho Y_m. \quad (6)$$

### 3.3 Интегрирование уравнений законов сохранения

Согласно алгоритму 1, для интегрирования уравнений законов сохранения (1)–(3) сначала вычисляются их конвективные члены:

$$\begin{aligned} [\nabla \cdot (\phi \mathbf{U})]_{i,j,k} = & \frac{u_{i+1/2,j,k} \phi_{i+1/2,j,k} - u_{i-1/2,j,k} \phi_{i-1/2,j,k}}{\Delta x} + \\ & + \frac{v_{i,j+1/2,k} \phi_{i,j+1/2,k} - v_{i,j-1/2,k} \phi_{i,j-1/2,k}}{\Delta y} + \\ & + \frac{w_{i,j,k+1/2} \phi_{i,j,k+1/2} - w_{i,j,k-1/2} \phi_{i,j,k-1/2}}{\Delta z}, \end{aligned} \quad (7)$$

для  $\phi = \rho Y_m, \rho h$ ;

$$\begin{aligned} [\mathbf{U} \cdot \nabla \phi]_{i+1/2,j,k} = & u_{i+1/2,j,k} \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{i+1/2,j,k} + \\ & + \tilde{v}_{i+1/2,j,k} \left( \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_{i+1/2,j,k} + \\ & + \tilde{w}_{i+1/2,j,k} \left( \frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_{i+1/2,j,k}, \end{aligned} \quad (8)$$

для  $\phi = u$  на гранях с индексами  $i \pm 1/2, j, k$ ;  $\phi = v$  на гранях с индексами  $i, j \pm 1/2, k$ ;  $\phi = w$  на гранях с индексами  $i, j, k \pm 1/2$ . Индекс  $(\tilde{\cdot})$  обозначает осреднение величины, например

$$\begin{aligned} \tilde{v}_{i+1/2,j,k} &= \frac{1}{4} (v_{i,j+1/2,k} + v_{i,j-1/2,k} + v_{i+1,j+1/2,k} + v_{i+1,j-1/2,k}), \\ \tilde{w}_{i+1/2,j,k} &= \frac{1}{4} (w_{i,j,k+1/2} + w_{i,j,k-1/2} + w_{i+1,j,k+1/2} + w_{i+1,j,k-1/2}). \end{aligned}$$

Очевидно, что формула (8) для вычисления  $[\mathbf{U} \cdot \nabla \phi]$  на каждой грани меняется соответствующим образом. Значения  $\phi$ ,  $\partial\phi/\partial x$ ,  $\partial\phi/\partial y$  и  $\partial\phi/\partial z$  на гранях вычисляются согласно схеме WENO3 по значениям в центрах ячеек.

Тепловой и диффузионные потоки аппроксимируются на гранях ячеек стандартным для разнесенной сетки образом по полученным выше значениям первичных (и вычисленных по ним вторичных) переменных [9]. Для того чтобы исключить диффузионный перенос массы через грань (являющийся известной проблемой [10, 11] модели средних по смеси диффузионных потоков) в работе применяется метод коррекции, который состоит во введении специальной поправки  $\mathbf{V}_c$ :

$$\rho \mathbf{V}_c = \sum_m \mathcal{F}_m.$$

Скорректированный таким образом диффузионный поток будет иметь вид

$$\mathbf{\Gamma}_m = \mathcal{F}_m + \rho Y_m \mathbf{V}_c, \quad \sum_m \mathbf{\Gamma}_m = 0.$$

Аппроксимация тензора вязких напряжений  $\boldsymbol{\tau}$  и вычисление его дивергенции проводятся стандартным для разнесенной сетки образом [9].

После представленных подготовительных вычислений уравнения (1) и (3) интегрируются для нахождения величин  $(\rho Y_m)^{n+1}$  и  $(\rho h)^{n+1}$ :

$$\begin{aligned} (\rho Y_m)_{i,j,k}^{n+1} &= (\rho Y_m)_{i,j,k}^n - \Delta t \nabla \cdot (\rho Y_m \mathbf{U})^n + \Delta t \nabla \cdot \mathbf{\Gamma}_m, \\ (\rho h)_{i,j,k}^{n+1} &= (\rho h)_{i,j,k}^n - \Delta t \nabla \cdot (\rho h \mathbf{U})^n + \Delta t \nabla \cdot \left( \lambda^n (\nabla T)^n + \sum_m h_m^n \mathbf{\Gamma}_m^n \right), \end{aligned}$$

где дивергенция диффузионного и теплового потока, рассчитываемая по значениям в центрах граней и имеющая результат в центрах ячеек, вычисляется аналогично формуле (7). Далее плотность смеси  $\rho^{n+1}$  находится по формуле (6).

Аппроксимация по времени для уравнения (2), преобразованного с учетом уравнения неразрывности, записывается следующим образом:

$$\frac{\mathbf{U}^{n+1} - \mathbf{U}^n}{\Delta t} + \nabla \cdot (\mathbf{U} \otimes \mathbf{U})^n = \frac{1}{\rho^n} \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}^n - \frac{1}{\rho^n} \nabla \pi^{n+1}.$$

Для его решения используется схема типа предиктор-корректор. Предиктор для уравнения скорости имеет вид

$$(\mathbf{U})_{face}^* = (\mathbf{U})_{face}^n - \Delta t \nabla \cdot (\mathbf{U} \otimes \mathbf{U})^n + \frac{\Delta t}{\rho_{face}^n} \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}^n. \quad (9)$$

Здесь индекс *face* обозначает соответствующую грань для компонент вектора скорости, т.е. для скорости  $u$  индекс  $face = i \pm 1/2, j, k$  и т.д.

### 3.4 Коррекция поля скорости

Вычисленное согласно формуле (9) поле скорости  $\mathbf{U}^*$  не удовлетворяет условию (4) для  $\mathcal{S}^{n+1}$  [5], поэтому оно должно быть скорректировано с учетом условия на дивергенцию после вычисления  $\pi^{n+1}$ :

$$(\mathbf{U})_{face}^{n+1} = (\mathbf{U})_{face}^* - \frac{\Delta t}{\rho_{face}^n} \nabla \pi^{n+1}. \quad (10)$$

Уравнение для давления  $\pi^{n+1}$  выводится аналогично случаю несжимаемой жидкости [5]. Для этого необходимо взять дивергенцию от обеих частей (10), и, согласно условию (4), записать  $\mathcal{S}^{n+1} = \nabla \cdot \mathbf{U}^{n+1}$ . Тогда

$$\nabla \cdot \frac{1}{\rho^n} \nabla \pi^{n+1} = \frac{1}{\Delta t} (\nabla \cdot \mathbf{U}^* - \mathcal{S}^{n+1}). \quad (11)$$

Выражение (11) представляет собой уравнение Пуассона относительно  $\pi^{n+1}$ . Аппроксимация операторов, входящих в уравнение, проводится, как и ранее, стандартным для разнесенной сетки образом.

## 4 Использование иерархических блочно-адаптивных сеток

В настоящей работе для автоматического разрешения особенностей решения используются динамические адаптивные блочно-структурированные сетки (AMR) [2]. При таком подходе строится иерархия подсеток, покрывающих всю расчетную область, с пространственным разрешением, варьирующимся в зависимости от локальных особенностей решения. Пример блочно-структурированной сетки, используемой для построения иерархии адаптивных сеток, представлен на рис. 1.

Иерархия блоков адаптивной сетки образует дерево. Все блоки сеток имеют идентичную логическую структуру однородной декартовой ортогональной сетки. Любой подблок может, в свою очередь, снова быть измельчен тем же способом. Этот процесс продолжается до тех пор, пока вся поверхность вычислений не будет покрыта блоками нужного пространственного разрешения. Блоки сеток предполагаются логически структурированными, т.е. сетка внутри блока имеет структуру декартовой ортогональной сетки, ячейки которой индексируются тремя целочисленными индексами. При этом физическая геометрия сетки может быть декартовой, цилиндрической, сферической, полярной или любой другой. Каждый блок сеток имеет приписанное число слоев фиктивных ячеек на каждой границе. Эти фиктивные ячейки

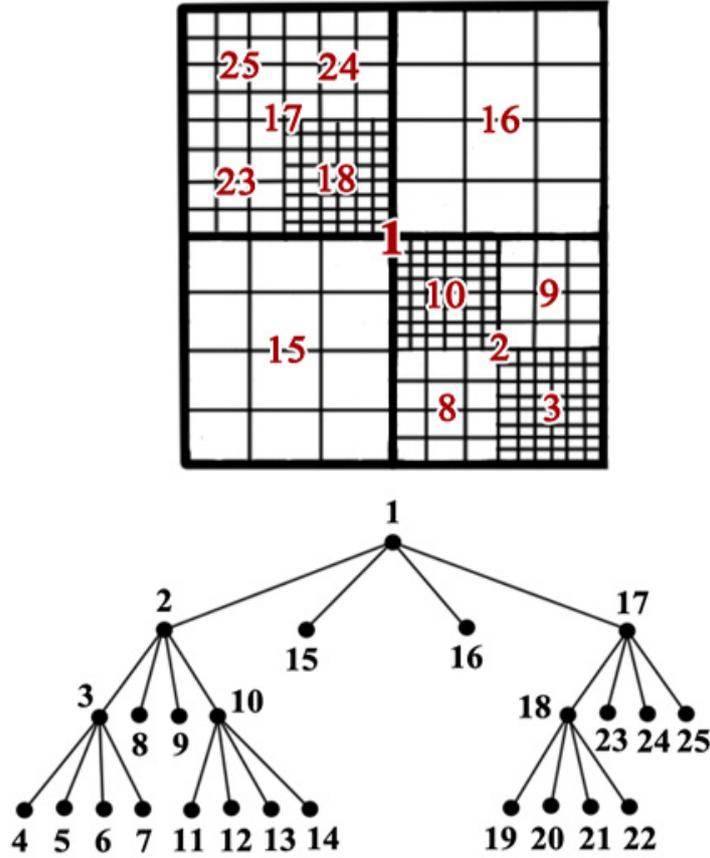


Рис. 1. Представление адаптивной блочно-структурированной сетки в виде логического дерева

заполняются данными из соответствующих соседних блоков или вычислением заданных граничных условий, если граница блока совпадает с границей расчетной области.

Степень измельчения определяется локально в соответствии с заданным критерием. В настоящей работе используется следующий критерий для величины  $D$ , в качестве которой может выступать температура, плотность и т.д. в зависимости от конкретной задачи:

$$E_{i_x, i_y, i_z} = \left[ \frac{\sum_{pq} \left( \frac{\partial^2 D}{\partial x_p \partial x_q} \Delta x_p \Delta x_q \right)^2}{\sum_{pq} \left( \left[ \left| \frac{\partial D}{\partial x_p} \right|_{i_p+1/2} + \left| \frac{\partial D}{\partial x_p} \right|_{i_p-1/2} \right] \Delta x_p + \varepsilon \frac{\partial^2 |D|}{\partial x_p \partial x_q} \Delta x_p \Delta x_q \right)^2} \right]^{1/2},$$

где  $p$  и  $q$  обозначают координатные направления,  $\varepsilon$  – некоторый весовой ко-

эффицент, а  $\partial^2|D|$  находится по аналогии со следующей формулой [12]:

$$\left[ \frac{\partial^2|D|}{\partial x \partial y} \right]_{i,j,k} = \frac{|D_{i+1,j+1,k}| + |D_{i+1,j-1,k}| + |D_{i-1,j+1,k}| + |D_{i-1,j-1,k}|}{4 \Delta x \Delta y}.$$

## 5 Особенности программной реализации

Представленные в предыдущих разделах уравнения и алгоритмы легли в основу программного комплекса TCS-3D, реализованного на языках программирования Fortran и C/C++ с использованием интерфейса параллельного программирования MPI.

Реализация параллельной версии программы с использованием блочно-структурированных сеток AMR основана на использовании библиотеки PARAMESH [13]. Достоинством этой библиотеки является то, что она полностью берет на себя ответственность за динамическое измельчение и укрупнение блоков сеток, создание, изменение и поддержку целостности внутренних структур данных программы (в частности, деревьев, определяющие пространственные отношения блоков), динамическое распределение и балансировку данных между потоками исполнения, распределение блоков между доступными для вычисления процессорами, управление всеми межблоковыми и межпроцессорными коммуникациями, а также заполнение массивов фиктивных ячеек.

Решение уравнения Пуассона (11) для коррекции скорости осуществлялось при помощи свободно распространяемого пакета HYPRE [14]. Данный пакет содержит множество процедур для решения систем линейных алгебраических уравнений и предобуславливателей для них. В настоящей работе для расчетов использовался алгебраический многосеточный метод Boomer AMG.

Для интегрирования уравнений химической кинетики был выбран известный и хорошо зарекомендовавший себя свободно распространяемый пакет VODE (использована его версия с двойной точностью DVODE) [15].

Выходные данные программы для визуализации записываются с помощью библиотеки HDF5 [16].

## 6 Результаты расчетов

В данном разделе приведены результаты тестовых расчетов, демонстрирующих работоспособность разработанного программного комплекса. Расчеты проводились на суперкомпьютере K-100, установленном в Институте прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, а также с использованием вычислительных мощностей Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН. В зависимости от серии расчетов использовались от 12 до 72 вычислительных ядер.

## 6.1 Расчет вихрей Тейлора-Грина

Для проверки работоспособности вычислительного ядра рассмотрим сначала результаты моделирования развития вихрей Тейлора-Грина в трехмерной постановке. Данная задача часто используется как средство тестирования программных кодов высокого разрешения, в том числе предназначенных для прямого моделирования турбулентных течений, см., например, [17–19].

Расчетная область задавалась в виде  $-0.016 \text{ м} \leq x, y, z \leq 0.016 \text{ м}$ , использовалась декартова ортогональная расчетная сетка с числом узлов  $128 \times 128 \times 128$ . В данном случае адаптивное измельчение сетки не применялось.

Модель течения описывалась уравнениями Навье-Стокса для вязкой несжимаемой жидкости. Расчеты проводились при числе Рейнольдса  $\mathfrak{R} = 1600$  и кинематической вязкости  $\nu = 1.392 \times 10^{-5} \text{ м}^2/\text{с}$ . При обезразмеривании задачи в качестве масштаба длины была выбрана величина  $L = L_0/(2\pi)$ , где  $L_0$  – длина ребра расчетной области.

На границе области были заданы периодические граничные условия. Начальные условия для скорости задавались в виде

$$\begin{cases} u = u_0 \sin\left(\frac{x}{L}\right) \cos\left(\frac{y}{L}\right) \cos\left(\frac{z}{L}\right), \\ v = -v_0 \cos\left(\frac{x}{L}\right) \sin\left(\frac{y}{L}\right) \cos\left(\frac{z}{L}\right), \\ w = 0. \end{cases}$$

На рис. 2 показаны распределения вертикальной компоненты завихренности скорости в моменты времени  $t = 0, 8.0 \times 10^{-3}, 1.4 \times 10^{-2}, 2.0 \times 10^{-2}, 3.0 \times 10^{-2}, 4.0 \times 10^{-2}, 8.0 \times 10^{-2}, 1.2 \times 10^{-1} \text{ с}$ . С течением времени наблюдается потеря устойчивости и разрушение заданных в начальный момент времени крупномасштабных структур, сопровождающаяся перемешиванием. Полученные результаты хорошо согласуются с аналогичными расчетами других авторов, см., например, [17–19].

## 6.2 Расчет течения в кубической каверне

Аналогично предыдущему расчету, была поставлена задача проверки работоспособности программного комплекса, но уже с включенным адаптивным измельчением сетки. Для этих целей было проведено моделирование течения в кубической каверне.

Расчетная область представляет собой куб со стороной  $L_x = L_y = L_z = L = 1.0 \text{ м}$ . На всех границах стоят условия прилипания, при этом верхняя граница движется со скоростью  $u = 1.0, v = w = 0 \text{ м/с}$ . Модель течения

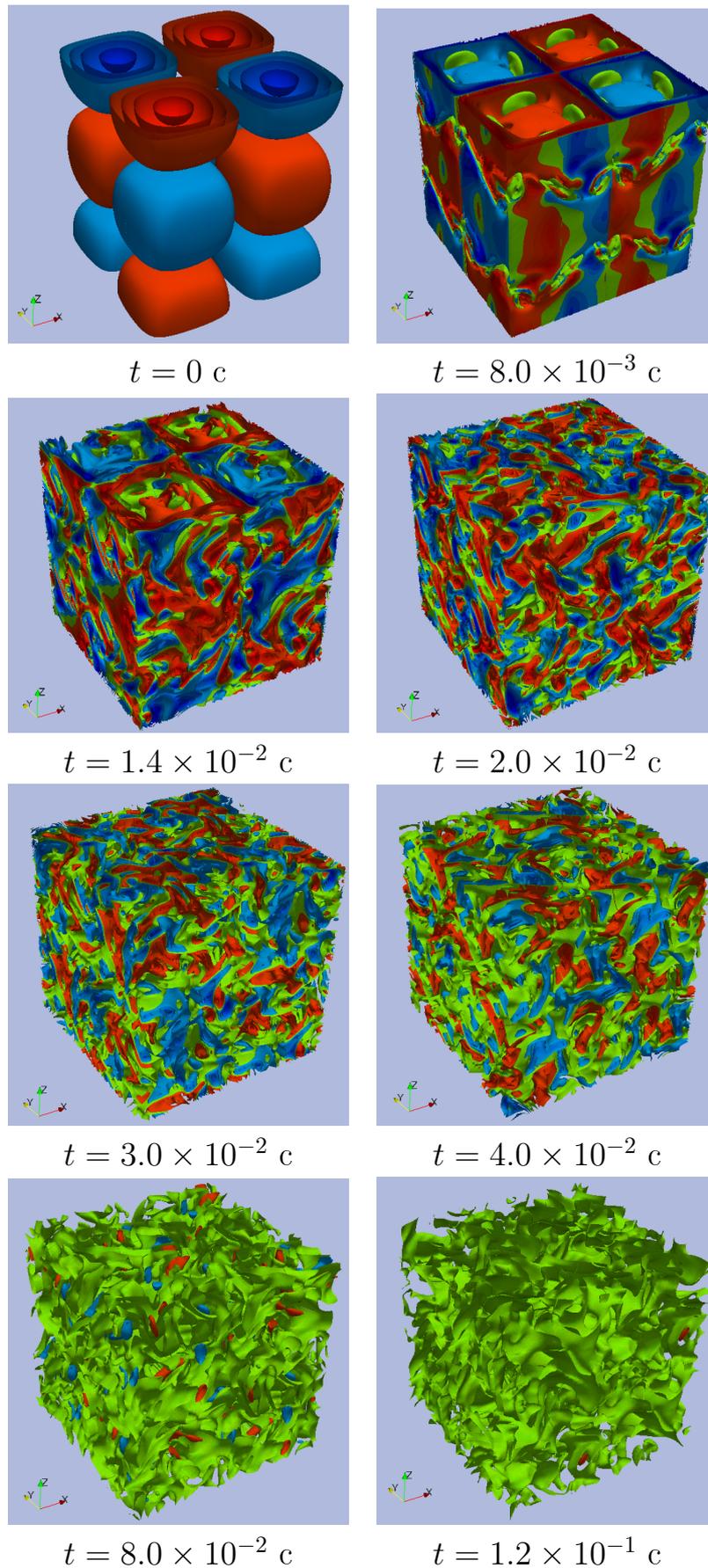


Рис. 2. Вертикальная компонента завихренности в последовательные моменты времени в задаче о вихрях Тейлора-Грина

описывалась уравнениями Навье-Стокса для вязкой несжимаемой жидкости. Расчет проводился для числа Рейнольдса  $\Re = 100$ .

В расчетной области вводилась начальная сетка, в которой каждый блок сетки содержал  $4 \times 4 \times 4$  ячейки, а число блоков начального уровня составляло  $4 \times 4 \times 4$ . Расчеты проводились с использованием трех уровней сетки, таким образом самая подробная сетка состояла из  $64 \times 64 \times 64$  ячеек.

Адаптация осуществлялась по полю модуля скорости, использовалось несколько вариантов параметров для критерия измельчения. Пример адаптивной сетки в начальный момент времени и на установившемся решении при двух вариантах адаптации приведен на рис. 3.

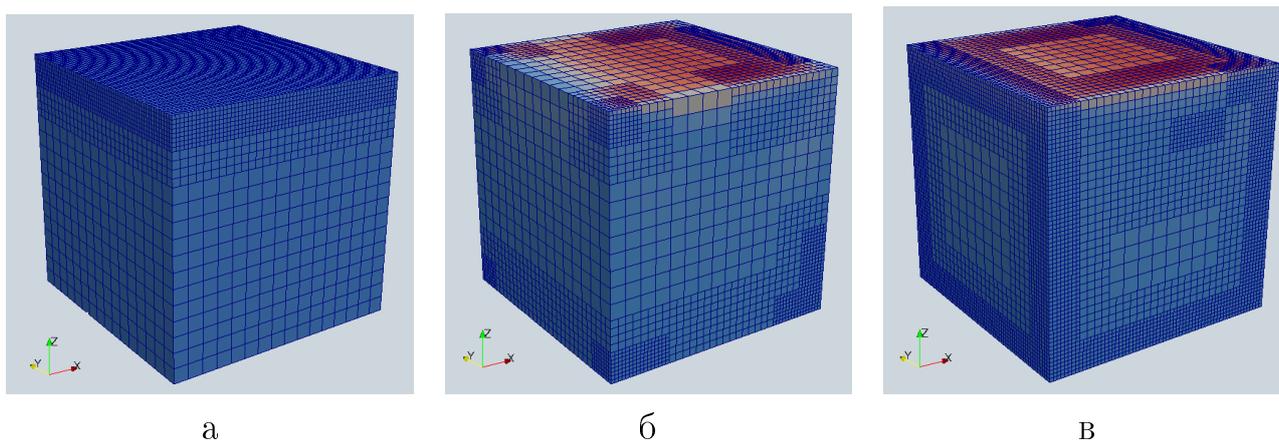


Рис. 3. Адаптивная сетка в начале (а) и конце расчета при двух вариантах адаптации (б,в)

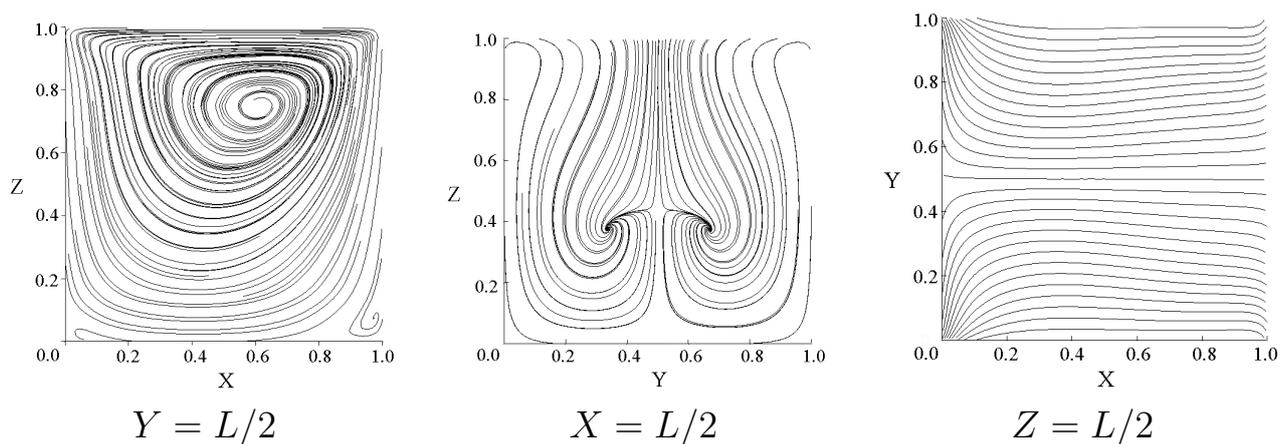


Рис. 4. Проекция линий тока на соответствующие плоскости, проходящие через центр кубической каверны

На рис. 4 приведены линии, касательные к векторным полям  $(u, 0, w)$ ,  $(0, v, w)$ ,  $(u, v, 0)$  в плоскостях, параллельных координатным плоскостям и проходящих через центр куба  $(L/2, L/2, L/2)$ , в расчете с адаптацией (в).

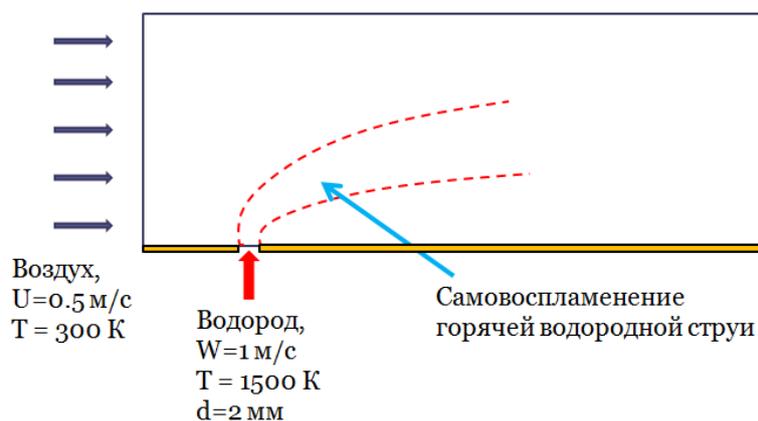


Рис. 5. Схема течения в задаче о диффузионном горении водорода

Полученное в этом расчете решение хорошо согласуется с известными результатами, например, [20]. В целом следует заметить, что для данной задачи трудно выделить какую-либо ярко выраженную особенность в потоке, за счет чего применение адаптивных сеток становится менее эффективным, поскольку приемлемое решение возможно получить только при существенном измельчении сетки в большой области.

### 6.3 Расчет диффузионного горения водорода

Рассмотрим задачу о ламинарном горении при вдуве горячего водорода в поперечный поток воздуха. Водород с температурой 1500 К подавался вертикально из плоской щели шириной 2 мм со скоростью 1 м/с, поперечный поток воздуха имел скорость 0.5 м/с, температура воздуха на входной границе была постоянной и равной 300 К. Расчетная область имела размер  $80 \times 40 \times 32$  мм, при этом вдоль координатного направления  $y$  все распределения были однородными, так что задача, фактически, решалась как двумерная.

В расчетной области, представленной на рис. 5, вводилась начальная сетка с размером ячейки 1 мм по координатным направлениям  $x$  и  $z$ , при этом каждый блок сетки содержал  $4 \times 2 \times 4$  ячейки, а число блоков начального уровня составляло  $20 \times 1 \times 8$ . Расчеты проводились с использованием двух и трех уровней сетки, адаптация осуществлялась по полю плотности, что позволяло разрешать области больших градиентов как температуры, так и концентрации водорода. Для горения водорода использовалась кинетическая схема, содержащая 9 веществ ( $\text{H}_2$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{H}$ ,  $\text{O}$ ,  $\text{OH}$ ,  $\text{HO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}_2$  и  $\text{N}_2$ ) и 12 реакций [21].

На рис. 6 показаны распределения температуры и относительной мольной концентрации радикала  $\text{OH}$  в три момента времени при расчете на двухуровневой сетке. Видно, что по мере распространения пламени появляются

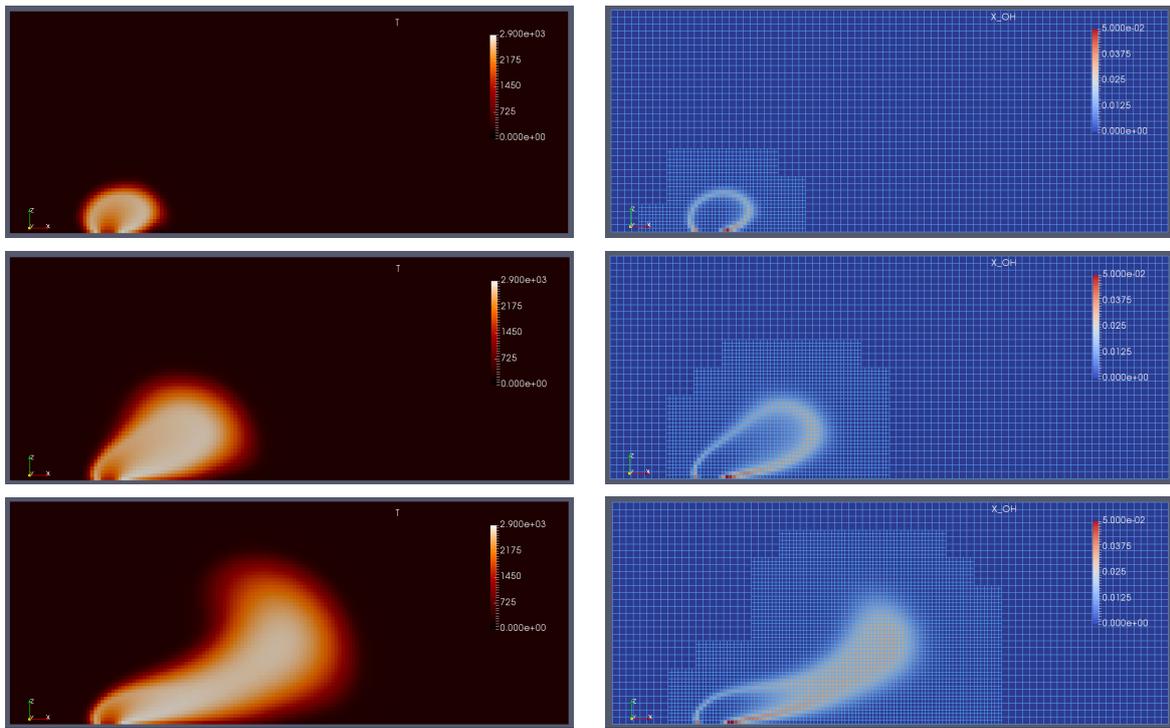


Рис. 6. Поля температуры (слева) и мольной доли радикала ОН (справа) в моменты времени  $t = 5, 20$  и  $40$  мс (сверху вниз) при расчете на двухуровневой сетке

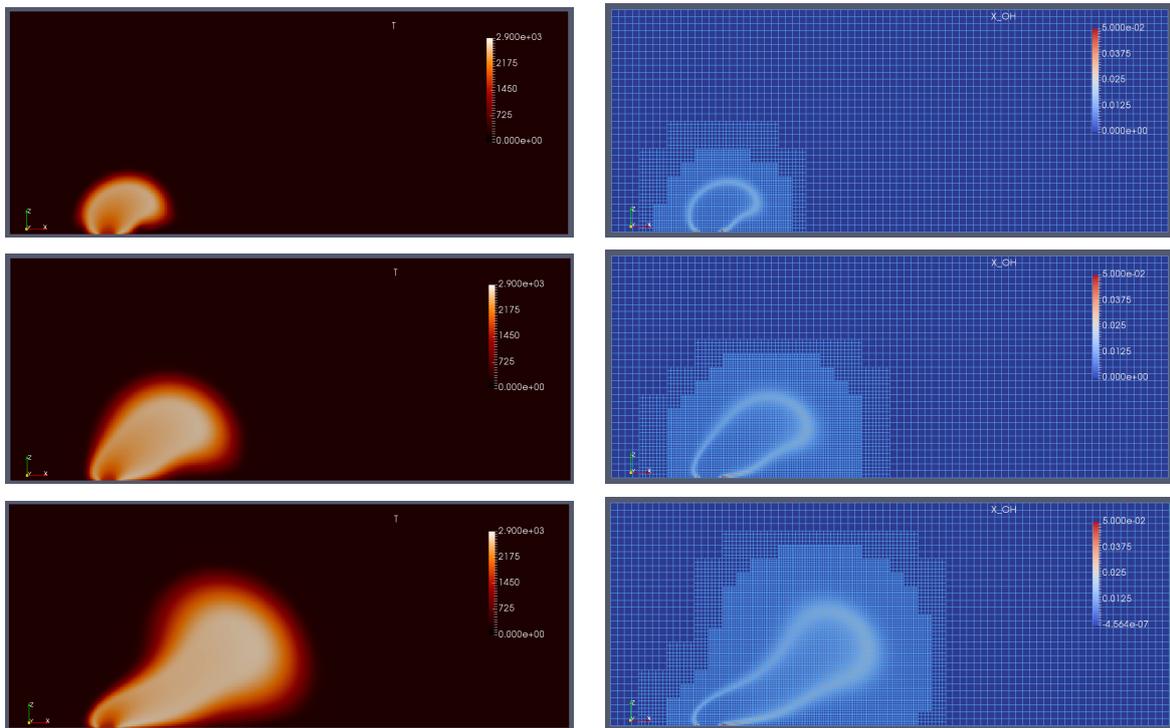


Рис. 7. Поля температуры (слева) и мольной доли радикала ОН (справа) в моменты времени  $t = 5, 15$  и  $28$  мс (сверху вниз) при расчете на трехуровневой сетке

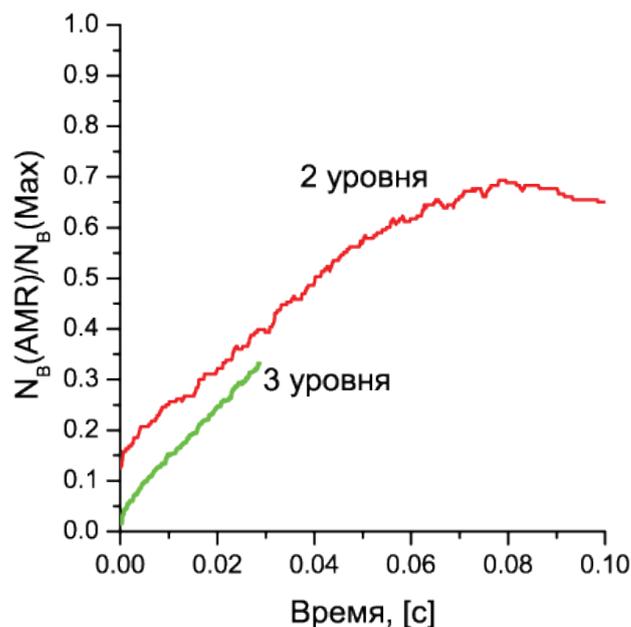


Рис. 8. Отношение числа блоков адаптивной сетки к максимальному числу блоков, необходимому для достижения того же разрешения на фиксированной сетке

дополнительные блоки мелкой сетки, отслеживающие область высоких градиентов температуры и концентрации. На рис. 7 представлены результаты аналогичных расчетов, проведенных на трехуровневой сетке.

Эффективность использования адаптивных сеток можно охарактеризовать отношением используемых в расчете блоков сетки к максимальному числу блоков самого высокого разрешения, которые необходимы для расчета без использования процедуры AMR. На рис. 8 представлена зависимость этого отношения от времени для двухуровневых и трехуровневых сеток (в последнем случае расчеты ограничены нестационарным участком, для двухуровневой сетки показано изменение числа блоков вплоть до выхода на стационарный режим течения).

Видно, что при используемых в расчете параметрах, по крайней мере, на нестационарном участке удается в несколько раз снизить объем вычислений за счет использования более грубых сеток вдали от источника вдува и области горения. Следует отметить, что эффективность применения адаптивных сеток сильно зависит от характера течения, наиболее оправдано их использование при наличии в потоке выраженных особенностей. Кроме того, требуется настройка критериальных параметров, определяющих измельчение и закругление сетки, с тем чтобы избежать и чрезмерного, и недостаточного измельчения сетки.

## 7 Заключение

В данной работе представлена вычислительная модель, которая легла в основу разработанного авторами параллельного программного комплекса TCS-3D для расчета существенно дозвуковых течений с химическими реакциями.

Представлено подробное описание вычислительного ядра программы. В частности, алгоритм решения на одном сеточном блоке и процедура адаптивного измельчения сетки для используемых многоуровневых иерархий сеток.

Приведенные демонстрационные расчеты подтверждают работоспособность программного комплекса. Показана численная эффективность применения структурированных адаптивных иерархических сеток для расчета реагирующих течений газов, для которых характерно наличие относительно узких зон протекания реакции (фронтов пламени).

## Список литературы

- [1] Ю.В. Лапин, М.Х. Стрелец. Внутренние течения газовых смесей. М.: Наука, 1989.
- [2] John Bell and Marcus Day. Chapter 13 "Adaptive Methods for Simulation of Turbulent Combustion". Turbulent Combustion Modeling: Advances, New Trends and perspectives. Volume 95 of Fluid mechanics and its applications, Springer London, 2010, pp.201–329
- [3] В.Е. Борисов [и др.] Программный комплекс TCS 3D: математическая модель // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2015. № 6. 20 с.  
URL:<http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2015-6>
- [4] C.W. Shu. High order weighted essentially non-oscillatory schemes for convection dominated problems // SIAM Review, 2009, v.51, p.82–112.
- [5] Л.В. Быков, А.М. Молчанов, М.А. Щербаков, Д.С. Янышев. Вычислительная механика сплошных сред в задачах авиационной и космической техники. М.: ЛЕНАНД, 2015, 688 с.
- [6] J.B. Bell and D.L. Marcus. A second-order projection method for variable-density flows // J. Comput. Phys., 101:334-348, 1992
- [7] M.S. Day, J.B. Bell. Numerical simulation of laminar reacting flows with complex chemistry // Combustion Theory and Modelling, 4:4, pp. 535–556, DOI: 10.1088/1364-7830/4/4/309

- [8] М.П. Галанин, Е.Б. Савенков. Методы численного анализа математических моделей. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2010, 591 с.
- [9] V.G. Ferreira, M.F. Tomé, N. Mangiavacchi, A. Castelo, J.A. Cuminato, A.O. Fortuna and S. McKee. High-order upwinding and the hydraulic jump // *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 2002, 39: 549–583. doi:10.1002/fld.234
- [10] T.P. Coffe, J.M. Heimerl. Transport algorithms for premixed laminar steady-state flames // *Combust. Flame.*, 1981, 43, 273
- [11] V. Giovangigli. Convergent iterative methods for multicomponent diffusion // *IMPACT Comput. Sci. Eng.*, 1991, 3, pp. 244–76
- [12] The FLASH Code. <http://flash.uchicago.edu/site/flashcode/>
- [13] Parallel Adaptive Mesh Refinement. [http://www.physics.drexel.edu/~olson/paramesh-doc/Users\\_manual/amr.html](http://www.physics.drexel.edu/~olson/paramesh-doc/Users_manual/amr.html)
- [14] HYPRE Software. [http://computation.llnl.gov/project/linear\\_solvers/software.php](http://computation.llnl.gov/project/linear_solvers/software.php)
- [15] P.N. Brown, G.D. Byrne, A.C. Hindmarsh. VODE: a variable coefficient ODE solver. // *SIAM J. Sci. Stat. Comp.*, 1989, vol. 10, pp. 1038–1051.
- [16] HDF5 Tutorial. <https://www.hdfgroup.org/HDF5/Tutor/>
- [17] M. Brachet, D. Meiron, S. Orszag, B. Nickel, R. Morf, U. Frisch. Small-scale structure of the Taylor-Green vortex // *J. Fluid Mech.*, 1983, vol. 130, pp. 411–452.
- [18] E. Garnier, M. Mossi, P. Sagaut, P. Comte, M. Deville. On the use of shock-capturing schemes for large-eddy simulation // *J. Computational Physics*, 1999, vol. 153, pp. 273–311.
- [19] Т.Г. Елизарова, И.А. Широков. Ламинарный и турбулентный режимы распада вихря Тейлора-Грина // *Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша*. 2013. № 63. 16 с. URL:<http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2013-63>
- [20] В.А. Балашов, Е.Б. Савенков, Численное исследование квазигидродинамической системы уравнений для расчета течений при малых числах Маха // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.*, 55:10 (2015), 1773–1782
- [21] T. Poinso, D. Veynante. *Theoretical and Numerical Combustion*. 2nd Ed. Philadelphia, Edwards Inc., 2005, 522 p.

# Содержание

1	Введение	3
2	Краткое описание математической модели	3
3	Алгоритм решения на одном сеточном блоке	5
4	Использование иерархических блочно-адаптивных сеток	9
5	Особенности программной реализации	11
6	Результаты расчетов	11
7	Заключение	18
	Литература	18